

Blockspin-Konstruktion für das zweidimensionale Ising-Modell

Friedrich Bach

2. April 2013

Inhaltsverzeichnis

1. Vorbereitung	2
2. Ising-Modell	2
3. Renormierungsgruppe	3
3.1. 1D-Ising-Modell	3
3.1.1. Bestimmung der Renormierungsgleichung	3
3.1.2. Numerische Ergebnisse	6
3.2. 2D-Ising-Modell	7
3.2.1. Berechnung der Zustandssumme mittels Renormierung	7
3.2.2. Kritische Exponenten	11
4. Zusammenfassung	12
4.1. 1D und 2D Ising Modell	12
4.2. Verwandtschaft zur logistischen Gleichung	12
4.3. Ausblick	13
A. Code zur Renormierung	13
Literatur	14

1. Vorbereitung

Das Ising-Modell stellt eine Vereinfachung des Heisenberg-Modells dar und beschreibt den Ferromagnetismus in Festkörpern. Die Vereinfachungen bestehen zum Beispiel darin, dass die Spins nur zwei Werte (*up* oder *down*) annehmen können, sowie diskret an fest lokalisierten Stellen im Gitter vorkommen. Insbesondere tritt bei einer Betrachtung des Modells in zwei Dimensionen eine kritische Temperatur auf, bei welcher sich das makroskopische Verhalten des gesamten Systems kollektiv verändert. Dies ist zum Beispiel anhand der Wärmekapazität C oder der Suszeptibilität χ messbar. Die analytische Berechnung der Zustandssumme des zweidimensionalen Ising-Modells konnte etwa 20 Jahre nach Aufstellung des Problems durch E. Ising (1925) von L. Onsager (1944) durchgeführt werden, wobei dieser Lösungsweg recht kompliziert ist und im Folgenden noch vereinfacht werden konnte.

In diesem Vortrag soll durch die Blockspin-Konstruktion nach Kadanoff die Theorie der Renormierungsgruppen angewandt werden, um die Zustandssumme rekursiv zu berechnen. Danach lassen sich die kritische Temperatur wie auch die kritischen Exponenten näherungsweise auf einfache Art und Weise ausrechnen. Die Vorgehensweise ist dem Artikel „*Teaching the renormalization group*“ von Kadanoff und Maris [1] angelehnt.

2. Ising-Modell

Beim Ising-Modell sind die Spins s_i auf einem d -dimensionalen symmetrischen Gitter angeordnet und können nur die Werte -1 (*down*) und $+1$ (*up*) annehmen. Der reduzierte Hamiltonoperator sieht dann wie folgt aus:

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle p,q \rangle} s_p s_q - h \sum_p s_p, \quad \beta = \frac{1}{k_B T},$$

mit der Boltzmann-Konstanten k_B und der Kopplung

$$K = \frac{J}{k_B T} = \beta J,$$

welche invers von der Temperatur abhängt. Falls es eine kritische Temperatur T_c gibt, wird sich diese auch in K ausdrücken. Unter Vernachlässigung eines externen Magnetfeldes, $h = 0$, gibt die Kopplungskonstante $J > 0$ den Beitrag eines beliebigen Zustandes n

$$E_n = -J \sum_{\langle p,q \rangle} s_p s_q,$$

zur Gesamtenergie E des Systems an. Benachbarte Spins $\langle p,q \rangle$ mit gleichem Vorzeichen tragen dann mit $-J$ zur Gesamtenergie bei, Spins mit unterschiedlichem Vorzeichen dagegen mit $+J$.

Die Zustandssumme Z ergibt sich dann über die Spur aller möglichen Zustände im kanonischen Ensemble

$$Z = \text{Sp}(e^{-\beta\mathcal{H}}) = \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta \sum_n E_n} = \sum_{s=\pm 1} e^{K \sum_{\langle p,q \rangle} s_p s_q}$$

und die Wahrscheinlichkeit einen Zustand des Systems mit der Energie E_n anzutreffen ist dann gegeben durch

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}.$$

Aus der Zustandssumme $Z = Z(N, K)$ lässt sich dann das thermodynamische Potential des kanonischen Ensembles, die Freie Energie

$$F(N, K) = -k_B T \ln Z(N, K),$$

bestimmen. Mit Hilfe des thermodynamischen Potentials können diverse makroskopische Eigenschaften (z.B. die Magnetisierung M) des Systems bestimmt werden. Ziel der folgenden Untersuchung ist es also, die Zustandssumme für das Ising-Modell zu berechnen. Dies konnte für 1D und für 2D bereits analytisch durchgeführt werden:

- 1D (E. Ising 1925) [2]:

$$Z(N, K) = (2 \cosh K)^N, \quad (1)$$

- 2D (L. Onsager 1944) [3]:

$$Z(N, K) = (2 \cosh(2K) e^I)^N, \quad (2)$$

$$I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}) \right],$$

$$\kappa = 2 \frac{\sinh(2K)}{\cosh^2(2K)}.$$

3. Renormierungsgruppe

Mit Hilfe der Renormierungsgruppe soll die Berechnung nun näherungsweise durchgeführt werden. Hier wird die Blockspin-Eigenschaft des Ising-Modells ausgenutzt, welche im vorherigen Vortrag vorgestellt wurde. Zunächst soll dies anschaulich für 1D geschehen um dann auf 2D übertragen werden zu können.

3.1. 1D-Ising-Modell

3.1.1. Bestimmung der Renormierungsgleichung

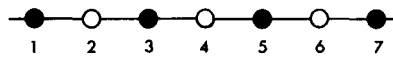


Abbildung 1: 1D-Ising-Modell

Im eindimensionalen Fall kann das Ising-Modell, wie in Abbildung 1 gezeigt, als Kette von N äquidistant lokalisierten Spins $p = 1, \dots, N$ aufgefasst werden. Die Zustandssumme

$$Z = \sum_{s_p = \pm 1} \exp \left(K \sum_p s_p s_{p+1} \right) = \sum_{s_p = \pm 1} \prod_p e^{K \cdot s_p s_{p+1}}$$

3.1 1D-Ising-Modell

wird nun ausgewertet, indem Blockspins gebildet werden:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_p=\pm 1} \prod_p e^{K \cdot s_p s_{p+1}} = \sum_{s_p=\pm 1} e^{K(\dots + s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_5 + \dots)} \\ &= \sum_{s_p=\pm 1} \dots e^{K(s_1 s_2 + s_2 s_3)} e^{K(s_3 s_4 + s_4 s_5)} \dots \end{aligned} \quad (3)$$

In (3) wurden nun Blockspins für die Spins mit geradem Index gebildet. Eine Auswertung über die Möglichen Spinkonfigurationen ergibt z.B. bei s_2 :

$$\sum_{s_p=\pm 1} e^{K(s_1 s_2 + s_2 s_3)} = \sum_{s_p=\pm 1} \left(e^{K(s_1 + s_3)} + e^{-K(s_1 + s_3)} \right). \quad (4)$$

Dies wird so nun für alle geraden Indizes durchgeführt und es ergibt sich:

$$Z = \sum_{s_p=\pm 1} \dots \left(e^{K(s_1 + s_3)} + e^{-K(s_1 + s_3)} \right) \cdot \left(e^{K(s_3 + s_5)} + e^{-K(s_3 + s_5)} \right) \dots \quad (5)$$

Blockspin-Hypothese: Nun fasst man die Spins mit ungeradem Index um die bereits ausgewerteten Spins mit geradem Index wieder in einen Anteil zur Zustandssumme so zusammen, dass sich nach der Skalierung um den Faktor 2 (da jeder zweite Spin bereits ausgeführt wurde) skaleninvariant die nächst größere Skala eine neue Zustandssumme ergibt. Zu dieser tragen nur noch Spins mit ungeradem Index bei, wobei hier ein modifizierter Vorfaktor $f(K)$ und eine modifizierte Kopplung K' benötigt wird. Diese Blockspin-Hypothese führt nun für den Blockspin um s_2 in (4) auf die folgende Gleichung:

$$e^{K(s_1 + s_3)} + e^{-K(s_1 + s_3)} = f(K) e^{K' s_1 s_3}. \quad (6)$$

Diese Gleichung kann universell für alle Spins mit geradem Index aufgestellt werden und soll nun exemplarisch für die möglichen Einstellungen von s_1 und s_3 gelöst werden. Es gibt hier $2 \times 2 = 4$ verschiedene Möglichkeiten die Spins einzustellen, wobei sich dies aufgrund einer einfachen Symmetrieüberlegung direkt auf 2 Möglichkeiten runterbricht, gleichartige oder unterschiedliche Spineinstellung von s_1 und s_3 in (6):

$$\begin{aligned} e^{2K} + e^{-2K} &= f(K) e^{K'}, \\ 2 &= f(K) e^{-K'}. \end{aligned}$$

Diese Gleichungen können noch entkoppelt werden indem die erste durch die zweite Gleichung geteilt wird:

$$\frac{2 \cosh(2K)}{2} = \frac{f(K) e^{K'}}{f(K) e^{-K'}} = e^{2K'} \Rightarrow K' = \frac{\ln(\cosh(2K))}{2}, \quad (7)$$

bzw. multipliziert wird:

$$4 \cosh(2K) = f^2(K) e^0 \Rightarrow f(K) = 2 \sqrt{\cosh(2K)}. \quad (8)$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen und der Tatsache, dass sie für alle Spins gelten, kann in die Zustandssumme (5) mit $q = 1, 3, \dots$ nun wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_q=\pm 1} \dots f(K) e^{K' s_1 s_3} f(K) e^{K' s_3 s_5} \dots \\ &= f(K)^{N/2} \sum_{s_q=\pm 1} e^{K'(\dots + s_1 s_3 + s_3 s_5 + \dots)}. \end{aligned}$$

3.1 1D-Ising-Modell

Die Zustandssumme wurde nun auf eine weitere Zustandssumme der selben Form renormiert, welche nur noch die Hälfte der Gitterpunkte (alle mit ungeradem Index) enthält. Dies lässt sich auch durch folgende Funktionalgleichung für die Zustandssumme $Z(N, K)$ ausdrücken:

$$Z(N, K) = f(K)^{N/2} Z(N/2, K'). \quad (9)$$

Da die Freie Energie F eine in der Teilchenzahl extensive Größe ist, also $F \propto N$ kann die Zustandssumme in Abhängigkeit einer Proportionalitätskonstanten $\zeta(K)$ gewählt werden:

$$\ln Z(N, K) = N\zeta(K).$$

Wenn wir hier obige Funktionalgleichung einsetzen erhalten wir

$$\begin{aligned} \ln Z(N, K) &= \frac{N}{2} \ln f(K) + \ln Z(N/2, K') = \frac{N}{2} \ln f(K) + \frac{1}{2} \zeta(K') = N\zeta(K) \\ \Leftrightarrow \quad \zeta(K) &= \frac{\ln f(K)}{2} + \frac{\zeta(K')}{2}, \end{aligned} \quad (10)$$

bzw. mit (8):

$$\zeta(K') = 2\zeta(K) - \ln(2\sqrt{\cosh(2K)}). \quad (11)$$

Die Gleichungen (7) und (11) bilden nun eine Rekursion, die es erlaubt, bei gegebenen Startwerten, die weiteren Werte von K' und $\zeta(K)$ zu berechnen. Physikalisch stellt sich also nur noch das Problem, dass die Startwerte der Rekursion ermittelt werden müssen. Da (7) immer unter den Werten von $K' = K$ bleibt, strebt die Rekursion als stabilen Fixpunkt den Wert $K^* = 0$ an, ausgehend von größeren Startwerten. Am einfachsten lassen sich physikalisch jedoch die Startwerte für kleine $K \approx 0$ finden, da hier große Temperaturen T herrschen und die Spineinstellungen dort erwartungsgemäß gleich verteilt sein sollten, also $Z = 2^N$ mögliche Zustände existieren, da jeder Zustand gleich wahrscheinlich ist.

Daher ist nun eine Formulierung gesucht, in der die Rekursion anwächst, sodass mit einem kleinen Startwert beginnend alle weiteren Punkte berechnet werden können. Dazu wird Gleichung (7) nach K gelöst und in (10) eingesetzt:

$$\begin{aligned} K &= \frac{\operatorname{acosh}(e^{2K'})}{2}, \\ \zeta(K) &= \frac{1}{2} \ln \left[2\sqrt{\cosh(\operatorname{acosh}(e^{2K'}))} \right] + \frac{1}{2} \zeta(K') \\ &= \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} K' + \frac{1}{2} \zeta(K'). \end{aligned} \quad (12) \quad (13)$$

Diese Gleichung ist nun eine in K steigende Rekursion und man kann mit kleinen Startwerten beginnend die Rekursion ausführen. So werden hier $K = 0,01$ und nach vorheriger Überlegung $Z = 2^N$ als Startwerte genutzt. Es folgt dann $N\zeta = \ln Z = \ln(2^N) = N \ln 2$ und die Rekursion kann aufsteigend nach folgendem Schema durchgeführt werden:

$$\begin{aligned} K' = 0,01 &\Rightarrow \zeta(K' = 0,01) \approx \ln 2 \\ &\Downarrow \\ K &= \frac{\operatorname{acosh}(e^{2K'})}{2} \\ K' &:= K \\ \zeta(K') &= \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} K' + \frac{1}{2} \zeta(K'). \end{aligned} \quad (14)$$

Ein entsprechender Code in C++ ist im Anhang A aufgeführt.

3.1.2. Numerische Ergebnisse

Nun können die Werte in jedem Rekursionsschritt ausgegeben werden und der Schleifendurchlauf weiter bei (14) fortgeführt werden. So kann man rekursiv Werte für $\zeta(K)$ erhalten, wie in Tabelle 1 mit dem C++-Programm berechnet und mit den exakten Werten

$$\zeta_{\text{exakt}} = \frac{1}{N} \ln Z_{\text{exakt}}(K) \stackrel{(1)}{=} \ln(2 \cosh K)$$

verglichen werden. Es fällt auf, dass mit zunehmender Rekursion die Abweichung vom

Tabelle 1: Vergleich der durch Renormierung bestimmten Werte für ζ mit den analytisch exakt berechneten.

K	$\zeta_{\text{ren}}(K)$	$\zeta_{\text{exakt}}(K)$	Abweichung
0.010000	$\ln 2$	0.693197	0.999928
0.100334	0.698147	0.698172	0.999964
0.327447	0.745814	0.745827	0.999983
0.636247	0.883204	0.883210	0.999993
0.972710	1.106299	1.106302	0.999997
1.316710	1.386078	1.386080	0.999999
1.662637	1.697968	1.697968	1.000000
2.009049	2.026876	2.026877	1.000000
2.355582	2.364536	2.364536	1.000000
2.702146	2.706633	2.706633	1.000000

exakten Wert verschwindend gering wird. Dies kann man in (12) leicht nachweisen, da

$$\operatorname{acosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \ln(2x)$$

gilt und mit $x = e^{2K'}$ gilt also, da die e-Funktion monoton steigend ist:

$$\frac{1}{2} \operatorname{acosh}(e^{2K'}) \xrightarrow{K' \rightarrow \infty} \frac{\ln(2e^{2K'})}{2} = \frac{1}{2} \ln 2 + K'. \quad (15)$$

In Abbildung 2 ist der Rekursionsweg der in Tabelle 1 bestimmten Werte eingezeichnet. Beginnend von den Startwerten wird anhand von K' der Wert für K berechnet. Dann wird im nächsten Schritt $K' := K$ gesetzt und neu K berechnet. Man sieht, dass die Werte für K bei großen K' einfach zwischen der Asymptoten und der spiegelnden Achse in gleichen Abständen berechnet werden. Dies geschieht schon bei sehr kleinen K' , das Rekursionsverfahren scheint schon nach wenigen Schritten zu konvergieren. Der Fluss dieses Rekursionsschemas ist in Abbildung 3 gegeben. Hier werden die Fixpunkte¹ $K^* = 0$ und $K^* = \infty$ ersichtlich.

Die Fixpunkte in diesem Fall sind $K' = K^* = 0$ und $K' = K^* = \infty$, wobei ersterer (entspricht $T \rightarrow \infty$) instabil ist, daher alle Flüsse ins unendliche streben, es wird also kein

¹An einem Fixpunkt x^* eines Flusses $f(x)$ gilt $f(x^*) = x^*$.

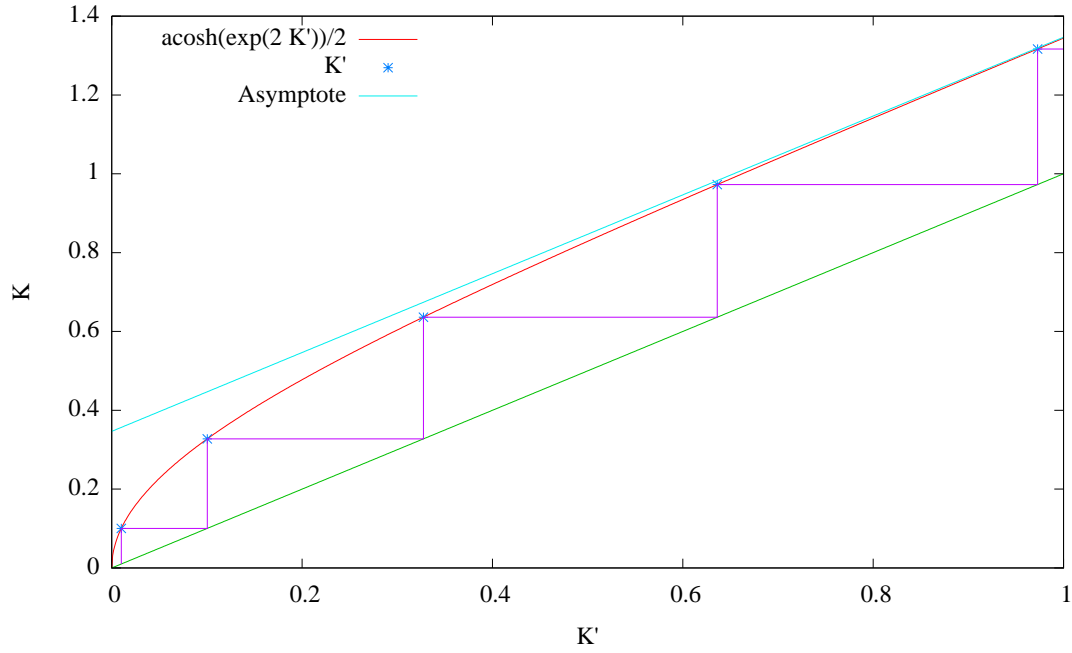


Abbildung 2: Trajektorie nach Abbildungsforschrift (12) mit nach Tabelle 1 erfolgter Rekursion. Die Gerade zeigt die Asymptote (15).

stabiler, endlicher Fixpunkt angelaufen. Dies ist auch klar, da die Steigung von $K(K')$ für alle K' größer als 1 ist:

$$\frac{dK}{dK'} = \frac{e^{2K'}}{\sqrt{e^{4K'} - 1}} \geq 1 \quad \forall K' > 0.$$

Das bedeutet, dass der Wert im folgenden Rekursionsschritt immer größer sein wird, als der im Vorherigen, K' also streng monoton steigt, wie der Fluss in Abbildung 3 zeigt.



Abbildung 3: Fluss im 1D-Ising-Modell. Quelle: [1]

3.2. 2D-Ising-Modell

3.2.1. Berechnung der Zustandssumme mittels Renormierung

Die Vorgehensweise im 2D-Ising-Modell ist weitgehend ähnlich zum eindimensionalen. Es wird ein Gitter mit $N \times N$ äquidistanten Gitterpunkten betrachtet. In Abbildung 4a) ist ein solches Gitter gegeben. Es wird vorgegangen wie im eindimensionalen, so werden zunächst Blockspins um die schwarzen Spins (mit den griechischen Indizes α, β, \dots) gebildet. Das Gitter wird also um den Faktor $\sqrt{2}$ skaliert, wobei die Anzahl der Spins halbiert wird. Zunächst muss wieder die Zustandssumme in eine Funktionalgleichung mit diesen

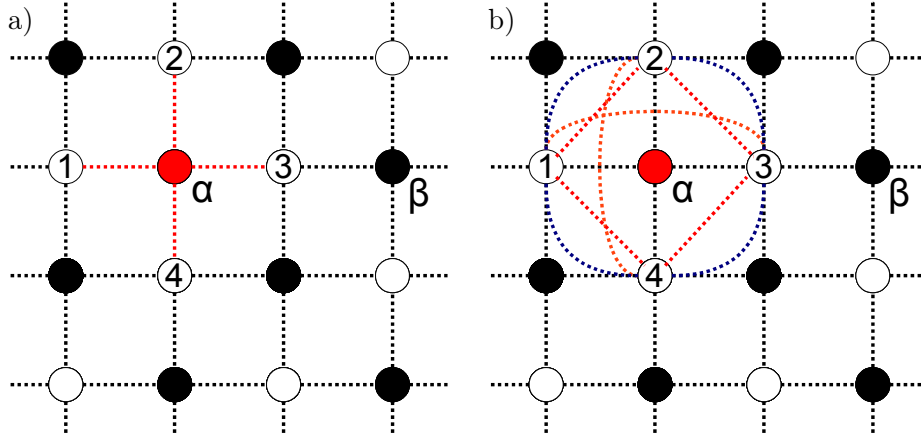


Abbildung 4: Blockspin Bildung der schwarzen Spins im zweidimensionalen Gitter.

Blockspins überführt werden. Hierzu werden beispielhaft die Spins um s_α in Abbildung 4b) zu einem Blockspin gebildet, der Beitrag zur Summe Energie an s_α ist:

$$\sum_{s_p=\pm 1} e^{K(s_1+s_2+s_3+s_4)} + e^{-K(s_1+s_2+s_3+s_4)}.$$

Für diesen Beitrag versuchen wir zunächst wieder eine linearisierte Gleichung zu finden, dazu wählen wir den Ansatz:

$$e^{K(s_1+s_2+s_3+s_4)} + e^{-K(s_1+s_2+s_3+s_4)} = f \exp \left(\frac{1}{2} K_1 (s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4) + K_2 (s_1 s_3 + s_2 s_4) + K_3 s_1 s_2 s_3 s_4 \right),$$

welcher die benachbarten Spins um s_α berücksichtigt. Aus Abbildung 4b) ist das Produkt der diagonal benachbarten Spins für den Beitrag zu K_1 in rot eingezeichnet, das Produkt der übernächsten Nachbarn zu K_2 in orange und das Produkt aller um s_α benachbarter Spins für K_3 in blau. Nun können über alle 16 Möglichkeiten der Spinkonfiguration aus Symmetriegründen vier Gleichungen gefunden werden:

- Alle Spins gleich:

$$e^{4K} + e^{-4K} = f e^{2K_1+2K_2+K_3},$$

- $s_1 = s_3$ und $s_2 = s_4$ unterschiedlich:

$$2 = f e^{-2K_1+2K_2+K_3},$$

- ein Spin = ± 1 und drei Spins = ∓ 1 :

$$e^{2K} + e^{-2K} = f e^{-K_3},$$

- $s_1 = s_2$ und $s_3 = s_4$ unterschiedlich:

$$2 = f e^{-2K_2+K_3}.$$

3.2 2D-Ising-Modell

Diese Gleichungen lassen sich wieder wie zuvor lösen und es ergibt sich:

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{1}{4} \ln(\cosh(4K)), \\ K_2 &= \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)), \\ K_3 &= \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)) - \frac{1}{2} \ln(\cosh(2K)). \end{aligned}$$

Jedoch lässt sich hier keine Funktionalgleichung der Form von Gleichung (9) aufstellen. Ein Ansatz, hier $K_2 = 0$ und $K_3 = 0$ zu setzen, reproduziert eine zur 1D Lösung qualitativ gleichwertige Lösung mit

$$f(K) = 2(\cosh(2K))^{1/2}(\cosh(4K))^{1/8}. \quad (16)$$

Ein weiterer Ansatz ist es, hier die nichtlinearen Anteile von K_3 zu vernachlässigen, da der K_2 Term die übernächsten Nachbarn mit einschließt. Falls nun $K_3 = 0$ gesetzt wird, kann die Energie des Blockspin-Systems für den Zustand angegeben werden, in welchem alle Spins gleich ausgerichtet sind:

$$E = -Nk_BTK_1 - Nk_BTK_2.$$

Dieses Energiegleichgewicht zwischen den nächste Nachbarn und übernächste Nachbarn Termen motiviert die folgende Kopplung einzuführen:

$$K' = K_1 + K_2 = \frac{3}{8} \ln(\cosh(4K)). \quad (17)$$

Nun ergibt sich wieder die vorherige Funktionalgleichung

$$Z(N, K) = f(K)^{N/2} Z(N/2, K'), \quad (18)$$

wobei für $f(K)$ wie oben (16) gilt:

$$f(K) = 2(\cosh(2K))^{1/2}(\cosh(4K))^{1/8}.$$

Daraus folgt dann wieder unter Berücksichtigung der Extensivität der freien Energie:

$$\zeta(K') = 2\zeta(K) - \ln[2(\cosh(2K))^{1/2}(\cosh(4K))^{1/8}]. \quad (19)$$

In Abbildung 6 ist (17) eingezeichnet. Man erkennt, dass eine rekursive Abbildung, gespiegelt an der Diagonalen, immer gegen die stabilen Fixpunkte $K^* = 0$ und $K^* = \infty$ geht. Der Fluss ist in Abbildung 5 gezeigt, der Schnittpunkt von $K(K')$ mit der Diagonalen ist also ein instabiler Fixpunkt $K^* = K_c$. Durch Berechnung der Umkehrfunktion von

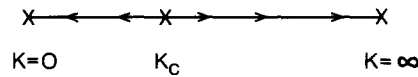


Abbildung 5: Fluss im 2D Ising Modell. Quelle: [1]

(17) muss nun der Fluss immer diesem dann stabilen Fixpunkt zulaufen. Eine rekursive Berechnung analog zum 1D Modell ergibt für die kritische Temperatur dann:

$$K_c = 0,506981 \dots$$

3.2 2D-Ising-Modell

Andererseits kann natürlich auch durch andere numerische Verfahren der Schnittpunkt der beiden Graphen anhand von (17) berechnet werden. Ein weiteres Verfahren der Lösung umschließt eine andere Wahl der Kopplungskonstanten. Einerseits lässt sich der Anteil von K_3 mit einbeziehen um den Wert für K_c verbessern, andererseits kann durch geschickte Wahl von K' eine analytische Lösung erreichen, welche jedoch relativ ungenau bleibt (siehe z.B. [4]).

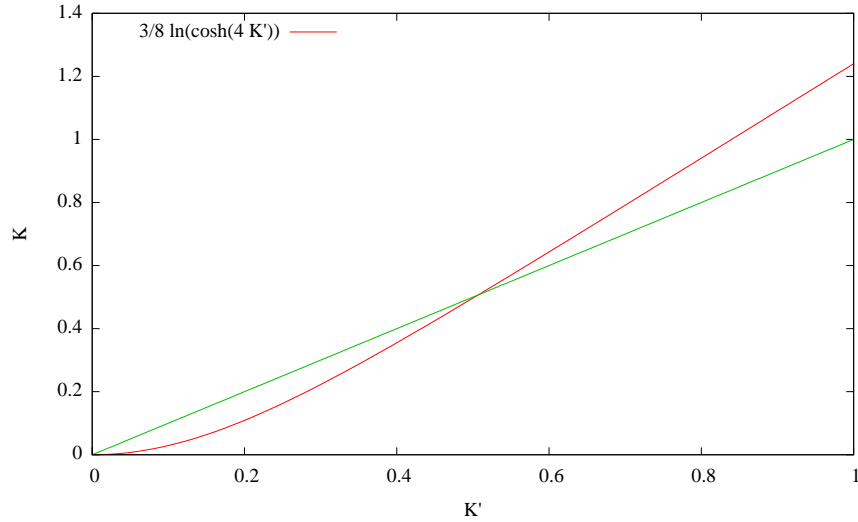


Abbildung 6: Trajektorie der Abbildungsvorschrift (17).

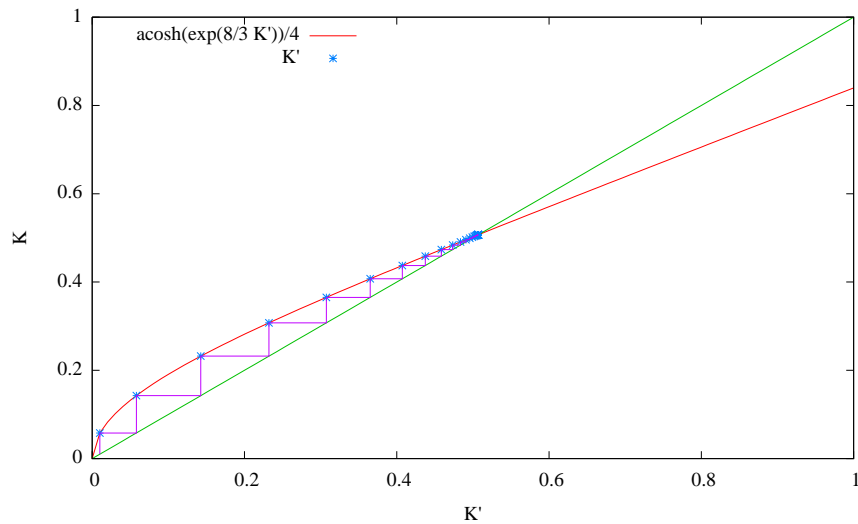


Abbildung 7: Rekursion zum kritischen Punkt K_c durch Bildung der Umkehrfunktion von (17).

3.2.2. Kritische Exponenten

Im vorherigen Abschnitt konnte gezeigt werden, dass das zweidimensionale Ising Modell eine kritische Temperatur aufweist. An diesem kritischen Punkt ist die Skaleninvarianz gegeben und man kann sehen, wie sich makroskopische Größen ändern. In den vorherigen Vorträgen wurden die kritischen Exponenten betrachtet und beispielhaft anhand der spezifischen Wärme untersucht, Abbildung 8 zeigt diese nach der analytischen Lösung, welche ein logarithmisches Divergenzverhalten aufweist:

$$C = \frac{dU}{dT} = -\frac{K}{T} \frac{dU}{dK}.$$

Die innere Energie ist gegeben als:

$$U = k_B T^2 \frac{d \ln Z}{dT} = -J \frac{d \ln Z}{dK}.$$

Es folgt dann für die spezifische Wärme:

$$C = -\frac{K}{T} \frac{d}{dK} \left(-J \frac{d \ln Z}{dK} \right) = \frac{KJ}{T} \frac{d^2 \ln Z}{dK^2} = \frac{KJ}{T} \frac{d^2 \zeta}{dK^2}.$$

Es wird erwartet, dass die spezifische Wärme C an K_c eine Singularität aufweist. In der zweiten Ableitung von ζ muss also ein divergierender Term vorhanden sein. Da keine analytische Form für ζ existiert, motiviert dies den Ansatz:

$$\zeta(K) \sim a|K - K_c|^{2-\alpha}, \quad (20)$$

wobei der Exponent $2-\alpha$ die Singularität bei einer Entwicklung in der zweiten Ableitung gewährleistet. Nun kann (17) um K_c in erster Ordnung entwickelt werden:

$$K' = K_c + (K - K_c) \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K_c}, \quad (21)$$

sowie auch $\zeta(K')$ aus (19) wegen (20):

$$\zeta(K') = 2\zeta(K) - \ln[2(\cosh(2K))^{1/2}(\cosh(4K))^{1/8}] \sim 2a|K - K_c|^{2-\alpha}$$

sowie auch auf der linken Seite:

$$\zeta(K') \sim a|K' - K_c|^{2-\alpha} \stackrel{(21)}{=} a \left| (K - K_c) \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K_c} \right|^{2-\alpha}$$

Wenn nun die linke und rechte Seite von (19) jeweils am kritischen Punkt in erster Ordnung entwickelt wurden, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} a|K - K_c|^{2-\alpha} \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K_c}^{2-\alpha} &= 2a|K - K_c|^{2-\alpha}, \\ \Leftrightarrow 2 &= \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K_c}^{2-\alpha}. \end{aligned}$$

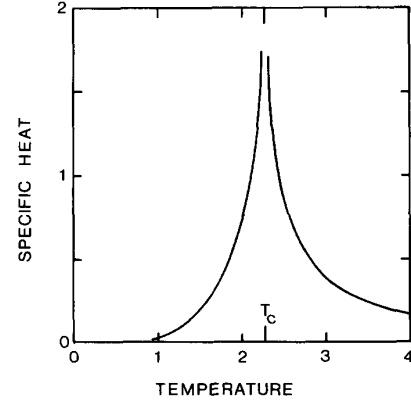


Abbildung 8: Spezifische Wärme des 2D Ising Modells. Quelle [1]

Und es folgt direkt für den kritischen Exponenten α :

$$\alpha = 2 - \frac{\ln 2}{\ln \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K_c}}.$$

Die Ableitung von (17) lässt sich leicht bilden:

$$\frac{dK'}{dK} = \frac{3}{2} \tanh(4K),$$

womit dann mithilfe des bereits ermittelten K_c der kritische Exponent berechnet werden kann:

$$\alpha = 0,131 \dots$$

4. Zusammenfassung

4.1. 1D und 2D Ising Modell

Die Berechnung der Zustandssumme durch die Renormierung konnte im eindimensionalen Fall das analytische Ergebnis exakt auflösen, die einzige Ungenauigkeit hier bestand in der Ungenauigkeit der Anfangsbedingungen. Die Berechnung kann hier jedoch den numerischen Aufwand sehr gering halten, da die Lösung wie in Tabelle 1 und Abbildung 1 gezeigt sehr schnell divergiert.

Im zweidimensionalen Fall konnte das Verhalten durch geschickte Wahl der Kopplung qualitativ nachvollzogen werden, eine kritische Temperatur konnte wie erwartet gefunden werden, wobei die Abweichung vom Wert $K_c = 0,506981 \dots$ aus der analytischen Lösung von Onsager (2) gering ist und durch geschicktere Wahl der Kopplung K' unter Berücksichtigung des nichtlinearen Anteils weiter optimiert werden kann.

4.2. Verwandschaft zur logistischen Gleichung

Die Renormierung lässt sich in vielen anderen Bereichen der Physik anwenden. Exemplarisch sei hier die Berechnung der Feigenbaum-Konstanten nach [5] herausgegriffen. Der Ansatz Feigenbaums [6], die logistische Gleichung

$$x_{n+1} = f(x_n) = rx_n(1 - x_n), \quad (22)$$

oder später verallgemeinert alle eindimensionalen Abbildungen, welche Periodenverdopplung hervorrufen, einzuordnen und den Weg ins Chaos so zu klassifizieren ist, auch wieder durch eine Renormierung gegeben. Dabei spielt die logistische Gleichung (22) die Rolle der zu bestimmenden Zustandssumme. Bei einem kritischen Wert, beim Ising Modell K_c ändert sich das makroskopische Verhalten massiv, der kritische Wert ist durch r_∞ gegeben, wobei r_n die Werte von r aus (22) sind, bei denen Periodenverdopplung vorliegt. Demzufolge ist r_n wie folgt definiert:

$$r_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{r_n - r_{n-1}}{r_{n+1} - r_n}.$$

Das makroskopische Verhalten ließ sich beim Ising Modell unter anderem anhand der spezifischen Wärme beobachten und aus der Lösung ablesen. Genauso zeigt der Ljapunov-Exponent λ dieses Verhalten, da bei $r > r_\infty$ der Ljapunov-Exponent negativ wird, was

4.3 Ausblick

chaotisches Verhalten bedeutet². Die Periodenverdopplung der Lösungen der logistischen Gleichung lassen sich durch den Periodenverdopplungsoperator $T(f)$ darstellen, wobei an einer kritischen Stelle

$$T(f^*) = f^*$$

gilt, was analog zum Verhalten der renormierten Zustandssumme (18) an der Stelle K_c ist:

$$Z(N, K_c) = f(K_c)^{N/2} Z(N/2, K_c).$$

Die Periodenverdopplung spielt also die Rolle der Bildung von Blockspins im Ising-Modell. Eine Tabelle der Gemeinsamkeiten von Phasenübergängen und Vorgängen bei Periodenverdopplung ist in [7] gegeben.

4.3. Ausblick

Die Renormierung erlaubt ein einfaches Konstrukt zum Lösen des ansonsten numerisch sehr aufwändigen 2D Ising Modells. Diese Methode lässt sich auf beliebige Dimensionen erweitern, sodass auch in 3D eine Zustandssumme und kritische Temperaturen berechnet werden können, wobei hier wieder physikalisch zweckmäßig die Nichtlinearen Anteile vernachlässigt werden müssen. Bisher gibt es die analytischen Lösungen nur für eindimensionale und zweidimensionale Problemstellungen.

Im letzten Abschnitt wurde gesehen, dass die Renormierungsgruppentheorie weitere Anwendungsgebiete besitzt. Man kann diese in Universalitätsklassen einteilen. Da jedoch in der Regel bei der Transformation, im Ising Modell von N auf $N/2$ Gitterpunkte Information der nichtlinearen Anteile verloren geht, ist die Renormierungsgruppe im eigentlichen Sinn eine Halbgruppe.

Ein weiteres, großes Anwendungsfeld ist die Quantenfeldtheorie, in welcher es durch Renormierung möglich ist, Divergenzen zu regularisieren.

A. Code zur Renormierung

Der folgende Code berechnet die Rekursion für das 1D Modell (auskommentiert 2D) und ist in C++ geschrieben.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

double zeta_exact(double k);
double zeta_ren(double k, double z_transf);
double K(double k);

int main(){

    double k;
    double z_transf;
```

²Der Ljapunov-Exponent ist definiert als Größe, bei welcher Trajektorien mit einem geringen Abstand δx der Initialbedingungen eine exponentielle Abweichung aufweisen, was typisch für chaotisches Verhalten ist.

```

int i=0;

k = 0.01;
z_transf = log(2.0);

while((k < 3.0) && (i < 10)){
    //AUSGABE (k,z_transf)

    z_transf = zeta_ren(k,z_transf);
    k = K(k);
    i++;
}
return 0;
}
double zeta_exact(double k){
    return log(2.0*cosh(k));
}
double K(double k){
    return acosh(exp(2.0*k))/2.0; //2D: acosh(exp(8.0/3.0*k))/4.0
}
double zeta_ren(double k, double z_transf){
    return log(2.0)/2.0 + k/2.0+z_transf/2.0;
    //2D: z_transf/2.0+3.0/8.0*log(2.0)+log(exp(8.0*k/3.0)+1.0)/8.0+k/6.0
}

```

Literatur

- [1] MARIS, HUMPHREY J und LEO P KADANOFF: *Teaching the renormalization group*. American Journal of Physics, 46:652–657, 1978.
- [2] ISING, ERNST: *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 31(1):253–258, 1925.
- [3] ONSAGER, LARS: *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. Physical Review, 65(3-4):117, 1944.
- [4] SCHWABL, F.: *Statistische Mechanik*. Springer Verlag, 2006.
- [5] ARGYRIS, JOHN H, G FAUST, M HAASE und R FRIEDRICH: *Die Erforschung des Chaos: Eine Einführung in die Theorie nichtlinearer Systeme*. Springer, 2010.
- [6] FEIGENBAUM, MITCHELL J: *Quantitative universality for a class of nonlinear transformations*. Journal of statistical physics, 19(1):25–52, 1978.
- [7] SCHUSTER, HEINZ GEORG und WOLFRAM JUST: *Deterministic chaos*. Wiley-VCH, 2006.